

## 特 許 協 力 条 約

PCT

## 国際予備審査報告

(法第12条、法施行規則第56条)  
[PCT36条及びPCT規則70]

REC'D 26 SEP 2003

WIPO

PCT

出願人又は代理人 の書類記号 PCLA-14602	今後の手続きについては、国際予備審査報告の送付通知(様式PCT/ IPEA/416)を参照すること。	
国際出願番号 PCT/JP02/13833	国際出願日 (日.月.年) 27.12.02	優先日 (日.月.年) 27.12.01
国際特許分類(IPC) Int. Cl <sup>7</sup> G06F17/30, G06F19/00		
出願人(氏名又は名称) セレスター・レキシコ・サイエンシズ株式会社		

1. 国際予備審査機関が作成したこの国際予備審査報告を法施行規則第57条(PCT36条)の規定に従い送付する。
2. この国際予備審査報告は、この表紙を含めて全部で <u>3</u> ページからなる。  <input checked="" type="checkbox"/> この国際予備審査報告には、附属書類、つまり補正されて、この報告の基礎とされた及び/又はこの国際予備審査機関に対してした訂正を含む明細書、請求の範囲及び/又は図面も添付されている。 (PCT規則70.16及びPCT実施細則第607号参照) この附属書類は、全部で <u>16</u> ページである。
3. この国際予備審査報告は、次の内容を含む。  I <input checked="" type="checkbox"/> 国際予備審査報告の基礎 II <input type="checkbox"/> 優先権 III <input type="checkbox"/> 新規性、進歩性又は産業上の利用可能性についての国際予備審査報告の不作成 IV <input type="checkbox"/> 発明の単一性の欠如 V <input checked="" type="checkbox"/> PCT35条(2)に規定する新規性、進歩性又は産業上の利用可能性についての見解、それを裏付けるための文献及び説明 VI <input type="checkbox"/> ある種の引用文献 VII <input type="checkbox"/> 国際出願の不備 VIII <input type="checkbox"/> 国際出願に対する意見

国際予備審査の請求書を受理した日 22.05.03	国際予備審査報告を作成した日 05.09.03		
名称及びあて先 日本国特許庁(IPEA/JP) 郵便番号100-8915 東京都千代田区霞が関三丁目4番3号	特許庁審査官(権限のある職員)  高瀬 勤	5M	9069
電話番号 03-3581-1101 内線 3597			

## I. 国際予備審査報告の基礎

1. この国際予備審査報告は下記の出願書類に基づいて作成された。(法第6条(PCT14条)の規定に基づく命令に  
応答するために提出された差し替え用紙は、この報告書において「出願時」とし、本報告書には添付しない。  
PCT規則70.16, 70.17)

☐ 出願時の国際出願書類

☒ 明細書 第 1-5, 12-27, 30 ページ、 出願時に提出されたもの  
明細書 第 \_\_\_\_\_ ページ、 国際予備審査の請求書と共に提出されたもの  
明細書 第 6-11, 11/1, 28, 29 ページ、 01.09.03 付の書簡と共に提出されたもの

☒ 請求の範囲 第 3, 6, 9, 12 項、 出願時に提出されたもの  
請求の範囲 第 \_\_\_\_\_ 項、 PCT19条の規定に基づき補正されたもの  
請求の範囲 第 \_\_\_\_\_ 項、 国際予備審査の請求書と共に提出されたもの  
請求の範囲 第 1, 2, 4, 5, 7, 8, 10, 11 項、 01.09.03 付の書簡と共に提出されたもの

☒ 図面 第 1-7 ~~ページ~~/図、 出願時に提出されたもの  
図面 第 \_\_\_\_\_ ページ/図、 国際予備審査の請求書と共に提出されたもの  
図面 第 \_\_\_\_\_ ページ/図、 \_\_\_\_\_ 付の書簡と共に提出されたもの

☐ 明細書の配列表の部分 第 \_\_\_\_\_ ページ、 出願時に提出されたもの  
明細書の配列表の部分 第 \_\_\_\_\_ ページ、 国際予備審査の請求書と共に提出されたもの  
明細書の配列表の部分 第 \_\_\_\_\_ ページ、 \_\_\_\_\_ 付の書簡と共に提出されたもの

2. 上記の出願書類の言語は、下記に示す場合を除くほか、この国際出願の言語である。

上記の書類は、下記の言語である \_\_\_\_\_ 語である。

- ☐ 国際調査のために提出されたPCT規則23.1(b)にいう翻訳文の言語  
☐ PCT規則48.3(b)にいう国際公開の言語  
☐ 国際予備審査のために提出されたPCT規則55.2または55.3にいう翻訳文の言語

3. この国際出願は、ヌクレオチド又はアミノ酸配列を含んでおり、次の配列表に基づき国際予備審査報告を行った。

- ☐ この国際出願に含まれる書面による配列表  
☐ この国際出願と共に提出された磁気ディスクによる配列表  
☐ 出願後に、この国際予備審査(または調査)機関に提出された書面による配列表  
☐ 出願後に、この国際予備審査(または調査)機関に提出された磁気ディスクによる配列表  
☐ 出願後に提出した書面による配列表が出願時における国際出願の開示の範囲を超える事項を含まない旨の陳述書の提出があった  
☐ 書面による配列表に記載した配列と磁気ディスクによる配列表に記載した配列が同一である旨の陳述書の提出があった。

4. 補正により、下記の書類が削除された。

☐ 明細書 第 \_\_\_\_\_ ページ  
☐ 請求の範囲 第 \_\_\_\_\_ 項  
☐ 図面 図面の第 \_\_\_\_\_ ページ/図

5. ☐ この国際予備審査報告は、補充欄に示したように、補正が出願時における開示の範囲を越えてされたものと認められるので、その補正がされなかったものとして作成した。(PCT規則70.2(c) この補正を含む差し替え用紙は上記1.における判断の際に考慮しなければならず、本報告に添付する。)

## V. 新規性、進歩性又は産業上の利用可能性についての法第12条(PCT35条(2))に定める見解、それを裏付ける文献及び説明

## 1. 見解

新規性 (N)	請求の範囲	1-12	有
	請求の範囲		無
進歩性 (IS)	請求の範囲	1-12	有
	請求の範囲		無
産業上の利用可能性 (IA)	請求の範囲	1-12	有
	請求の範囲		無

## 2. 文献及び説明 (PCT規則70.7)

国際調査報告で引用した

文献1: JP 5-282381 A(富士通株式会社)1993. 10. 29, 請求項1(ファミリーなし)

文献2: 古田 他, 蛋白質の二次構造予測支援エキスパート・エキスパートシステム, 情報処理学会第33回(昭和61年後期)全国大会講演論文集(II), 1986. 10. 01, p. 1197-1198

文献3: SIMONS, K. T. et al. Assembly of Protein Tertiary Structures from Fragments with Similar Local Sequences using Simulated Annealing and Bayesian Scoring Functions. JOURNAL OF MOLECULAR BIOLOGY, 1997. 04. 25, Vol. 268, No. 1, p. 209-225

文献4: BYSTROFF, C. et al. Prediction of Local Structure in Proteins Using a Library of Sequence Structure Motifs. JOURNAL OF MOLECULAR BIOLOGY, 1998. 08. 21, Vol. 281, No. 3, p. 565-577

文献5: BYSTROFF, C. et al. HMMSTR: A Hidden Markov Model for Local Sequence-Structure Correlations in Proteins. JOURNAL OF MOLECULAR BIOLOGY, 2000. 04. 04, Vol. 301, No. 1, p. 173-190

文献6: SIMONS, K. T. et al. Prospects for ab initio Protein Structural Genomics. JOURNAL OF MOLECULAR BIOLOGY, 2001. 03. 09, Vol. 306, No. 5, p. 1191-1199

請求の範囲1-12は文献1-6に対して進歩性を有する。

説明:

文献1にはタンパク質の局所構造間の相互作用の計算する立体構造解析装置が記載されている。

文献2には複数のタンパク質立体構造予測法による予測結果の比較を行うことが記載されている。

文献3-6はタンパク質立体構造予測の一般的技術水準を表す文献である。

文献1-6には、複数の断片構造予測プログラムの断片構造予測結果を比較することによりフラストレーションを計算し、相互作用部位を予測することは記載も示唆もされていない。

を予測する、複数の断片構造予測プログラムに対して上記入力手段により入力された上記一次配列情報の断片構造予測シミュレーションを実行させる断片構造予測プログラム実行手段と、上記断片構造予測プログラム実行手段による上記複数の上記断片構造予測プログラムの断片構造予測結果を比較する予測結果比較手段と、上記予測結果比較手段による比較結果に基づいて、上記目的のタンパク質の一次配列情報の局所部分のフラストレーションを計算するフラストレーション計算手段と、上記フラストレーション計算手段により計算された上記局所部分の上記フラストレーションにより上記目的のタンパク質の相互作用部位を予測する相互作用部位予測手段とを備えたことを特徴とする。

10 この装置によれば、目的のタンパク質の一次配列情報を入力し、タンパク質の一次配列情報から当該タンパク質の断片構造を予測する、複数の断片構造予測プログラムに対して入力された一次配列情報の断片構造予測シミュレーションを実行させ、複数の断片構造予測プログラムの断片構造予測結果を比較し、比較結果に基づいて、目的のタンパク質の一次配列情報の局所部分のフラストレーション  
15 を計算し、計算された局所部分のフラストレーションにより目的のタンパク質の相互作用部位を予測するので、タンパク質の一次配列情報においてフラストレーションのある局所部位を発見することにより相互作用部位を効果的に予測することができる。

つぎの発明にかかる相互作用部位予測装置は、目的のタンパク質の一次配列情報を入力する入力手段と、上記目的のタンパク質の立体構造データを取得する立体構造データ取得手段と、タンパク質の一次配列情報から当該タンパク質の断片構造を予測する、複数の断片構造予測プログラムに対して上記入力手段により入力された上記一次配列情報の断片構造予測シミュレーションを実行させる断片構造予測プログラム実行手段と、上記断片構造予測プログラム実行手段による上記  
20 複数の上記断片構造予測プログラムの断片構造予測結果と、上記立体構造データ取得手段により取得した上記立体構造データとを比較する予測結果比較手段と、上記予測結果比較手段による比較結果に基づいて、上記目的のタンパク質の一次

配列情報の局所部分のフラストレーションを計算するフラストレーション計算手段と、上記フラストレーション計算手段により計算された上記局所部分の上記フラストレーションにより上記目的のタンパク質の相互作用部位を予測する相互作用部位予測手段とを備えたことを特徴とする。

- 5       この装置によれば、目的のタンパク質の一次配列情報を入力し、目的のタンパク質の立体構造データを取得し、タンパク質の一次配列情報から当該タンパク質の断片構造を予測する、複数の断片構造予測プログラムに対して入力された一次配列情報の断片構造予測シミュレーションを実行させ、複数の断片構造予測プログラムの断片構造予測結果と、取得した立体構造データとを比較し、比較結果に
- 10       基づいて、目的のタンパク質の一次配列情報の局所部分のフラストレーションを計算し、計算された局所部分のフラストレーションにより目的のタンパク質の相互作用部位を予測するので、複数の断片構造予測プログラムの予測結果と目的のタンパク質の実際の断片構造との差を見ることにより、より明確にフラストレーションのある局所部位（相互作用部位になっている確率の高い部位）を見つける
- 15       ことが可能になる。

- つぎの発明にかかる相互作用部位予測装置は、上記に記載の相互作用部位予測装置において、上記断片構造予測プログラムの上記断片構造予測結果に対する確信度を示す確信度情報を設定する確信度情報設定手段をさらに備え、上記フラストレーション計算手段は、上記確信度情報設定手段により設定された上記確信度
- 20       情報および上記比較結果に基づいて、上記局所部分の上記フラストレーションを計算することを特徴とする。

- これはフラストレーション計算の一例を一層具体的に示すものである。この装置によれば、断片構造予測プログラムの断片構造予測結果に対する確信度を示す確信度情報を設定し、設定された確信度情報および比較結果に基づいて、局所部
- 25       分のフラストレーションを計算するので、確信度情報が高い（すなわち、シミュレーションの精度の高い）プログラムによる断片構造予測結果データに対する重みを高くすることにより、フラストレーション計算においてシミュレーション結

果に対する確信度を反映させることができるようになる。

また、本発明は相互作用部位予測方法に関するものであり、本発明にかかる相互作用部位予測方法は、目的のタンパク質の一次配列情報を入力する入力ステップと、タンパク質の一次配列情報から当該タンパク質の断片構造を予測する、複数の断片構造予測プログラムに対して上記入力ステップにより入力された上記一次配列情報の断片構造予測シミュレーションを実行させる断片構造予測プログラム実行ステップと、上記断片構造予測プログラム実行ステップによる上記複数の上記断片構造予測プログラムの断片構造予測結果を比較する予測結果比較ステップと、上記予測結果比較ステップによる比較結果に基づいて、上記目的のタンパク質の一次配列情報の局所部分のフラストレーションを計算するフラストレーション計算ステップと、上記フラストレーション計算ステップにより計算された上記局所部分の上記フラストレーションにより上記目的のタンパク質の相互作用部位を予測する相互作用部位予測ステップとを含むことを特徴とする。

この方法によれば、目的のタンパク質の一次配列情報を入力し、タンパク質の一次配列情報から当該タンパク質の断片構造を予測する、複数の断片構造予測プログラムに対して入力された一次配列情報の断片構造予測シミュレーションを実行させ、複数の断片構造予測プログラムの断片構造予測結果を比較し、比較結果に基づいて、目的のタンパク質の一次配列情報の局所部分のフラストレーションを計算し、計算された局所部分のフラストレーションにより目的のタンパク質の相互作用部位を予測するので、タンパク質の一次配列情報においてフラストレーションのある局所部位を発見することにより相互作用部位を効果的に予測することができる。

つぎの発明にかかる相互作用部位予測方法は、目的のタンパク質の一次配列情報を入力する入力ステップと、上記目的のタンパク質の立体構造データを取得する立体構造データ取得ステップと、タンパク質の一次配列情報から当該タンパク質の断片構造を予測する、複数の断片構造予測プログラムに対して上記入力ステップにより入力された上記一次配列情報の断片構造予測シミュレーションを実行

させる断片構造予測プログラム実行ステップと、上記断片構造予測プログラム実行ステップによる上記複数の上記断片構造予測プログラムの断片構造予測結果と、上記立体構造データ取得ステップにより取得した上記立体構造データとを比較する予測結果比較ステップと、上記予測結果比較ステップによる比較結果に基づいて、上記目的のタンパク質の一次配列情報の局所部分のフラストレーションを計算するフラストレーション計算ステップと、上記フラストレーション計算ステップにより計算された上記局所部分の上記フラストレーションにより上記目的のタンパク質の相互作用部位を予測する相互作用部位予測ステップとを含むことを特徴とする。

- 10      この方法によれば、目的のタンパク質の一次配列情報を入力し、目的のタンパク質の立体構造データを取得し、タンパク質の一次配列情報から当該タンパク質の断片構造を予測する、複数の断片構造予測プログラムに対して入力された一次配列情報の断片構造予測シミュレーションを実行させ、複数の断片構造予測プログラムの断片構造予測結果と、取得した立体構造データとを比較し、比較結果に基づいて、目的のタンパク質の一次配列情報の局所部分のフラストレーションを計算し、計算された局所部分のフラストレーションにより目的のタンパク質の相互作用部位を予測するので、複数の断片構造予測プログラムの予測結果と目的のタンパク質の実際の断片構造との差を見ることにより、より明確にフラストレーションのある局所部位（相互作用部位になっている確率の高い部位）を見つけることが可能になる。

- 20      つぎの発明にかかる相互作用部位予測方法は、上記に記載の相互作用部位予測方法において、上記断片構造予測プログラムの上記断片構造予測結果に対する確信度を示す確信度情報を設定する確信度情報設定ステップをさらに含み、上記フラストレーション計算ステップは、上記確信度情報設定ステップにより設定された上記確信度情報および上記比較結果に基づいて、上記局所部分の上記フラストレーションを計算することを特徴とする。

- 25      これはフラストレーション計算の一例を一層具体的に示すものである。この方

法によれば、断片構造予測プログラムの断片構造予測結果に対する確信度を示す確信度情報を設定し、設定された確信度情報および比較結果に基づいて、局所部分のフラストレーションを計算するので、確信度情報が高い（すなわち、シミュレーションの精度の高い）プログラムによる断片構造予測結果データに対する重  
5 みを高くすることにより、フラストレーション計算においてシミュレーション結果に対する確信度を反映させることができるようになる。

また、本発明はプログラムに関するものであり、本発明にかかるプログラムは、目的のタンパク質の一次配列情報を入力する入力ステップと、タンパク質の一次配列情報から当該タンパク質の断片構造を予測する、複数の断片構造予測プログラム  
10 に対して上記入力ステップにより入力された上記一次配列情報の断片構造予測シミュレーションを実行させる断片構造予測プログラム実行ステップと、上記断片構造予測プログラム実行ステップによる上記複数の上記断片構造予測プログラムの断片構造予測結果を比較する予測結果比較ステップと、上記予測結果比較ステップによる比較結果に基づいて、上記目的のタンパク質の一次配列情報の局  
15 所部分のフラストレーションを計算するフラストレーション計算ステップと、上記フラストレーション計算ステップにより計算された上記局所部分の上記フラストレーションにより上記目的のタンパク質の相互作用部位を予測する相互作用部位予測ステップとを含む相互作用部位予測方法をコンピュータに実行させることを特徴とする。

このプログラムによれば、目的のタンパク質の一次配列情報を入力し、タンパク質の一次配列情報から当該タンパク質の断片構造を予測する、複数の断片構造予測プログラムに対して入力された一次配列情報の断片構造予測シミュレーション  
20 を実行させ、複数の断片構造予測プログラムの断片構造予測結果を比較し、比較結果に基づいて、目的のタンパク質の一次配列情報の局所部分のフラストレーションを計算し、計算された局所部分のフラストレーションにより目的のタンパク質の相互作用部位を予測するので、タンパク質の一次配列情報においてフラストレーションのある局所部位を発見することにより相互作用部位を効果的に予測  
25



することができる。

つぎの発明にかかるプログラムは、目的のタンパク質の一次配列情報を入力する入力ステップと、上記目的のタンパク質の立体構造データを取得する立体構造データ取得ステップと、タンパク質の一次配列情報から当該タンパク質の断片構造を予測する、複数の断片構造予測プログラムに対して上記入力ステップにより入力された上記一次配列情報の断片構造予測シミュレーションを実行させる断片構造予測プログラム実行ステップと、上記断片構造予測プログラム実行ステップによる上記複数の上記断片構造予測プログラムの断片構造予測結果と、上記立体構造データ取得ステップにより取得した上記立体構造データとを比較する予測結果比較ステップと、上記予測結果比較ステップによる比較結果に基づいて、上記目的のタンパク質の一次配列情報の局所部分のフラストレーションを計算するフラストレーション計算ステップと、上記フラストレーション計算ステップにより計算された上記局所部分の上記フラストレーションにより上記目的のタンパク質の相互作用部位を予測する相互作用部位予測ステップとを含む相互作用部位予測方法をコンピュータに実行させることを特徴とする。

このプログラムによれば、目的のタンパク質の一次配列情報を入力し、目的のタンパク質の立体構造データを取得し、タンパク質の一次配列情報から当該タンパク質の断片構造を予測する、複数の断片構造予測プログラムに対して入力された一次配列情報の断片構造予測シミュレーションを実行させ、複数の断片構造予測プログラムの断片構造予測結果と、取得した立体構造データとを比較し、比較結果に基づいて、目的のタンパク質の一次配列情報の局所部分のフラストレーションを計算し、計算された局所部分のフラストレーションにより目的のタンパク質の相互作用部位を予測するので、複数の断片構造予測プログラムの予測結果と目的のタンパク質の実際の断片構造との差を見ることにより、より明確にフラストレーションのある局所部位（相互作用部位になっている確率の高い部位）を見つけることが可能になる。

つぎの発明にかかるプログラムは、上記に記載のプログラムにおいて、上記断

片構造予測プログラムの上記断片構造予測結果に対する確信度を示す確信度情報を設定する確信度情報設定ステップをさらに含み、上記フラストレーション計算ステップは、上記確信度情報設定ステップにより設定された上記確信度情報および上記比較結果に基づいて、上記局所部分の上記フラストレーションを計算する

5 ことを特徴とする。

これはフラストレーション計算の一例を一層具体的に示すものである。このプログラムによれば、断片構造予測プログラムの断片構造予測結果に対する確信度を示す確信度情報を設定し、設定された確信度情報および比較結果に基づいて、

WAN、インターネットに代表されるネットワークを介してプログラムを送信する場合の通信回線や搬送波のように、短期にプログラムを保持する「通信媒体」を含むものとする。

また、「プログラム」とは、任意の言語や記述方法にて記述されたデータ処理方法であり、ソースコードやバイナリコード等の形式を問わない。なお、「プログラム」は必ずしも単一的に構成されるものに限られず、複数のモジュールやライブラリとして分散構成されるものや、OS (Operating System) に代表される別個のプログラムと協働してその機能を達成するものをも含む。なお、実施の形態に示した各装置において記録媒体を読み取るための具体的な構成、読み取り手順、あるいは、読み取り後のインストール手順等については、周知の構成や手順を用いることができる。

また、ネットワーク 300 は、相互作用部位予測装置 100 と外部システム 200 とを相互に接続する機能を有し、例えば、インターネットや、イントラネットや、LAN (有線/無線の双方を含む) や、VAN や、パソコン通信網や、公衆電話網 (アナログ/デジタルの双方を含む) や、専用回線網 (アナログ/デジタルの双方を含む) や、CATV 網や、IMT 2000 方式、GSM 方式または PDC/PDC-P 方式等の携帯回線交換網/携帯パケット交換網や、無線呼出網や、Bluetooth 等の局所無線網や、PHS 網や、CS、BS または ISDB 等の衛星通信網等のうちいずれかを含んでもよい。すなわち、本システムは、有線・無線を問わず任意のネットワークを介して、各種データを送受信することができる。

以上詳細に説明したように、本発明によれば、目的のタンパク質の一次配列情報を入力し、タンパク質の一次配列情報から当該タンパク質の断片構造を予測する、複数の断片構造予測プログラムに対して入力された一次配列情報の断片構造予測シミュレーションを実行させ、複数の断片構造予測プログラムの断片構造予測結果を比較し、比較結果に基づいて、目的のタンパク質の一次配列情報の局所部分のフラストレーションを計算し、計算された局所部分のフラストレーション

により目的のタンパク質の相互作用部位を予測するので、タンパク質の一次配列情報においてフラストレーションのある局所部位を発見することにより相互作用部位を効果的に予測することができる相互作用部位予測装置、相互作用部位予測方法、プログラム、および、記録媒体を提供することができる。

- 5        また、本発明によれば、目的のタンパク質の一次配列情報を入力し、目的のタンパク質の立体構造データを取得し、タンパク質の一次配列情報から当該タンパク質の断片構造を予測する、複数の断片構造予測プログラムに対して入力された一次配列情報の断片構造予測シミュレーションを実行させ、複数の断片構造予測プログラムの断片構造予測結果と、取得した立体構造データとを比較し、比較結果に基づいて、目的のタンパク質の一次配列情報の局所部分のフラストレーションを計算し、計算された局所部分のフラストレーションにより目的のタンパク質の相互作用部位を予測するので、複数の断片構造予測プログラムの予測結果と目的のタンパク質の実際の断片構造との差を見ることにより、より明確にフラストレーションのある局所部位（相互作用部位になっている確率の高い部位）を見つ
- 10        けることが可能になる相互作用部位予測装置、相互作用部位予測方法、プログラム、および、記録媒体を提供することができる。

- さらに、本発明によれば、断片構造予測プログラムの断片構造予測結果に対する確信度を示す確信度情報を設定し、設定された確信度情報および比較結果に基づいて、局所部分のフラストレーションを計算するので、確信度情報が高い（すなわち、シミュレーションの精度の高い）プログラムによる断片構造予測結果データに対する重みを高くすることにより、フラストレーション計算においてシミュレーション結果に対する確信度を反映させることができる相互作用部位予測装置、相互作用部位予測方法、プログラム、および、記録媒体を提供することができる。
- 20

25

産業上の利用可能性

以上のように、本発明にかかる相互作用部位予測装置、相互作用部位予測方法、

請 求 の 範 囲

1. (補正後) 目的のタンパク質の一次配列情報を入力する入力手段と、  
タンパク質の一次配列情報から当該タンパク質の断片構造を予測する、複数の  
5 断片構造予測プログラムに対して上記入力手段により入力された上記一次配列情  
報の断片構造予測シミュレーションを実行させる断片構造予測プログラム実行手  
段と、  
上記断片構造予測プログラム実行手段による上記複数の上記断片構造予測プロ  
グラムの断片構造予測結果を比較する予測結果比較手段と、  
10 上記予測結果比較手段による比較結果に基づいて、上記目的のタンパク質の一  
次配列情報の局所部分のフラストレーションを計算するフラストレーション計算  
手段と、  
上記フラストレーション計算手段により計算された上記局所部分の上記フラス  
トレーションにより上記目的のタンパク質の相互作用部位を予測する相互作用部  
15 位予測手段と、  
を備えたことを特徴とする相互作用部位予測装置。
2. (補正後) 目的のタンパク質の一次配列情報を入力する入力手段と、  
上記目的のタンパク質の立体構造データを取得する立体構造データ取得手段と、  
20 タンパク質の一次配列情報から当該タンパク質の断片構造を予測する、複数の  
断片構造予測プログラムに対して上記入力手段により入力された上記一次配列情  
報の断片構造予測シミュレーションを実行させる断片構造予測プログラム実行手  
段と、  
上記断片構造予測プログラム実行手段による上記複数の上記断片構造予測プロ  
25 グラムの断片構造予測結果と、上記立体構造データ取得手段により取得した上記  
立体構造データとを比較する予測結果比較手段と、  
上記予測結果比較手段による比較結果に基づいて、上記目的のタンパク質の一

次配列情報の局所部分のフラストレーションを計算するフラストレーション計算手段と、

上記フラストレーション計算手段により計算された上記局所部分の上記フラストレーションにより上記目的のタンパク質の相互作用部位を予測する相互作用部位予測手段と、

を備えたことを特徴とする相互作用部位予測装置。

3. 上記断片構造予測プログラムの上記断片構造予測結果に対する確信度を示す確信度情報を設定する確信度情報設定手段、

をさらに備え、

上記フラストレーション計算手段は、上記確信度情報設定手段により設定された上記確信度情報および上記比較結果に基づいて、上記局所部分の上記フラストレーションを計算することを特徴とする請求の範囲第1項または第2項に記載の相互作用部位予測装置。

4. (補正後) 目的のタンパク質の一次配列情報を入力する入力ステップと、

タンパク質の一次配列情報から当該タンパク質の断片構造を予測する、複数の断片構造予測プログラムに対して上記入力ステップにより入力された上記一次配列情報の断片構造予測シミュレーションを実行させる断片構造予測プログラム実行ステップと、

上記断片構造予測プログラム実行ステップによる上記複数の上記断片構造予測プログラムの断片構造予測結果を比較する予測結果比較ステップと、

上記予測結果比較ステップによる比較結果に基づいて、上記目的のタンパク質の一次配列情報の局所部分のフラストレーションを計算するフラストレーション計算ステップと、

上記フラストレーション計算ステップにより計算された上記局所部分の上記フラストレーションにより上記目的のタンパク質の相互作用部位を予測する相互作用

用部位予測ステップと、

を含むことを特徴とする相互作用部位予測方法。

5. (補正後) 目的のタンパク質の一次配列情報を入力する入力ステップと、

5 上記目的のタンパク質の立体構造データを取得する立体構造データ取得ステップと、

タンパク質の一次配列情報から当該タンパク質の断片構造を予測する、複数の断片構造予測プログラムに対して上記入力ステップにより入力された上記一次配列情報の断片構造予測シミュレーションを実行させる断片構造予測プログラム実行ステップと、

10 上記断片構造予測プログラム実行ステップによる上記複数の上記断片構造予測プログラムの断片構造予測結果と、上記立体構造データ取得ステップにより取得した上記立体構造データとを比較する予測結果比較ステップと、

上記予測結果比較ステップによる比較結果に基づいて、上記目的のタンパク質の一次配列情報の局所部分のフラストレーションを計算するフラストレーション計算ステップと、

15 上記フラストレーション計算ステップにより計算された上記局所部分の上記フラストレーションにより上記目的のタンパク質の相互作用部位を予測する相互作用部位予測ステップと、

20 を含むことを特徴とする相互作用部位予測方法。

6. 上記断片構造予測プログラムの上記断片構造予測結果に対する確信度を示す確信度情報を設定する確信度情報設定ステップ、

をさらに含み、

25 上記フラストレーション計算ステップは、上記確信度情報設定ステップにより設定された上記確信度情報および上記比較結果に基づいて、上記局所部分の上記フラストレーションを計算することを特徴とする請求の範囲第4項または第5項

に記載の相互作用部位予測方法。

7. (補正後) 目的のタンパク質の一次配列情報を入力する入力ステップと、  
タンパク質の一次配列情報から当該タンパク質の断片構造を予測する、複数の  
5 断片構造予測プログラムに対して上記入力ステップにより入力された上記一次配  
列情報の断片構造予測シミュレーションを実行させる断片構造予測プログラム実  
行ステップと、

上記断片構造予測プログラム実行ステップによる上記複数の上記断片構造予測  
プログラムの断片構造予測結果を比較する予測結果比較ステップと、

10 上記予測結果比較ステップによる比較結果に基づいて、上記目的のタンパク質  
の一次配列情報の局所部分のフラストレーションを計算するフラストレーション  
計算ステップと、

上記フラストレーション計算ステップにより計算された上記局所部分の上記フ  
ラストレーションにより上記目的のタンパク質の相互作用部位を予測する相互作  
15 用部位予測ステップと、

を含むことを特徴とする相互作用部位予測方法をコンピュータに実行させるた  
めのプログラム。

8. (補正後) 目的のタンパク質の一次配列情報を入力する入力ステップと、

20 上記目的のタンパク質の立体構造データを取得する立体構造データ取得ステッ  
プと、

タンパク質の一次配列情報から当該タンパク質の断片構造を予測する、複数の  
断片構造予測プログラムに対して上記入力ステップにより入力された上記一次配  
列情報の断片構造予測シミュレーションを実行させる断片構造予測プログラム実  
25 行ステップと、

上記断片構造予測プログラム実行ステップによる上記複数の上記断片構造予測  
プログラムの断片構造予測結果と、上記立体構造データ取得ステップにより取得



した上記立体構造データとを比較する予測結果比較ステップと、

上記予測結果比較ステップによる比較結果に基づいて、上記目的のタンパク質の一次配列情報の局所部分のフラストレーションを計算するフラストレーション計算ステップと、

5      上記フラストレーション計算ステップにより計算された上記局所部分の上記フラストレーションにより上記目的のタンパク質の相互作用部位を予測する相互作用部位予測ステップと、

を含むことを特徴とする相互作用部位予測方法をコンピュータに実行させるためのプログラム。

10

9.    上記断片構造予測プログラムの上記断片構造予測結果に対する確信度を示す確信度情報を設定する確信度情報設定ステップ、

をさらに含み、

15      上記フラストレーション計算ステップは、上記確信度情報設定ステップにより設定された上記確信度情報および上記比較結果に基づいて、上記局所部分の上記フラストレーションを計算することを特徴とする請求の範囲第7項または第8項に記載のプログラム。

10.   (補正後)    目的のタンパク質の一次配列情報を入力する入力ステップと、

20      タンパク質の一次配列情報から当該タンパク質の断片構造を予測する、複数の断片構造予測プログラムに対して上記入力ステップにより入力された上記一次配列情報の断片構造予測シミュレーションを実行させる断片構造予測プログラム実行ステップと、

25      上記断片構造予測プログラム実行ステップによる上記複数の上記断片構造予測プログラムの断片構造予測結果を比較する予測結果比較ステップと、

上記予測結果比較ステップによる比較結果に基づいて、上記目的のタンパク質の一次配列情報の局所部分のフラストレーションを計算するフラストレーション

計算ステップと、

上記フラストレーション計算ステップにより計算された上記局所部分の上記フラストレーションにより上記目的のタンパク質の相互作用部位を予測する相互作用部位予測ステップと、

- 5      を含むことを特徴とする相互作用部位予測方法をコンピュータに実行させるためのプログラムを記録したことを特徴とするコンピュータ読み取り可能な記録媒体。

- 1 1. (補正後)    目的のタンパク質の一次配列情報を入力する入力ステップと、  
10      上記目的のタンパク質の立体構造データを取得する立体構造データ取得ステップと、

- タンパク質の一次配列情報から当該タンパク質の断片構造を予測する、複数の断片構造予測プログラムに対して上記入力ステップにより入力された上記一次配列情報の断片構造予測シミュレーションを実行させる断片構造予測プログラム実行  
15      ステップと、

上記断片構造予測プログラム実行ステップによる上記複数の上記断片構造予測プログラムの断片構造予測結果と、上記立体構造データ取得ステップにより取得した上記立体構造データとを比較する予測結果比較ステップと、

- 上記予測結果比較ステップによる比較結果に基づいて、上記目的のタンパク質  
20      の一次配列情報の局所部分のフラストレーションを計算するフラストレーション計算ステップと、

上記フラストレーション計算ステップにより計算された上記局所部分の上記フラストレーションにより上記目的のタンパク質の相互作用部位を予測する相互作用部位予測ステップと、

- 25      を含むことを特徴とする相互作用部位予測方法をコンピュータに実行させるためのプログラムを記録したことを特徴とするコンピュータ読み取り可能な記録媒体。

- 1 2. 上記断片構造予測プログラムの上記断片構造予測結果に対する確信度を